

ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФИЗИКИ

Ф.С.ДЖЕПАРОВ, Е.К.ХЕННЕР

МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС В МАГНИТОРАЗБАВЛЕННЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Препринт №10

Москва — ЦНИИатоминформ — 1987

УДК 539.I М-I6

МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС В МАГНИТОРАЗБАВЛЕННЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ: Препринт ИТЭФ 87-I0/

Ф.С.Джепаров, Е.К.Хеннер – М., ЦНИИатоминформ, 1987 – 23 с.

Рассмотрен парамагнитный резонано в неупорядоченной системе дипольно-взаимодействующих спинов при произвольных температурах зеемановской подсистемы и при условии, что $\beta\bar{E} \ll I$, где β – обратная дипольная температура, а $\bar{E}$-энергия взаимодействия спинов на среднем расстоянии. Сформулированы кинетические уравнения, вычислены теплоемкости подсистем, а также в рамках модели Андерсона получено явное выражение для функции формы линии. Показано, что при условии $\beta E_0 \gg I$, где E_0-энергия взаимодействия ближайших спинов, термодинамика спиновой системы, в отличие от высокотемпературного случая, в основном, определяется взаимодействиями на средних расстояниях. Для расчета формы линии предложен метод корреляционного разложения, а для расчета теплоемкостей использовано разложение по концентрации.

F.S.Dzheparov, E.K.Henner

MAGNETIC RESONANCE IN MAGNETICALLY DYLUTED SOLIDS AT LOW THEMPERATURES.

The paramagnetic resonance in the disordered spin systems with dipol-dipol interactions is considered. The theory is extended into the region, where $\beta\ \bar{E} \ll 1$ (β is the inverse dipol themperature, E is the interaction energy at the mean distance). The kinetic equations are formulated, and the heat capacities for real systems and the resonance form function for the Anderson model are calculated. It is shown that the spin thermodynamics at $\beta E_0 \gg 1$ (E_0 is the interaction energy for the nearest neithbors) is very different from the high themperature one and is ruled by the interactions at avarage distances. The correlation expansion is advanced to calculate the form function and the heat capacities are calculated using the concentration expansion.

Рис. – , список лит. – 2I наим.

I. В В Е Д Е Н И Е

Изучение величин, характеризующих магнитный резонанс в системе дипольно взаимодействующих спинов, является одной из самых фундаментальных задач радиоспектроскопии. С необходимостью расчёта или, хотя бы, оценки формы линии, термодинамических величин и скорости магнитной релаксации сталкиваются практически все теории, направленные на изучение свойств многочастичных систем. В случае магниторазбавленных веществ для оценки ширины и формы линии использовались, в основном, два подхода: метод моментов и статистический метод Андерсона [I,2] . Первый был подвергнут серьёзной критике [3,4] , а второй, после ряда обобщений [5-7] , пригоден для описания поглощения энергии высокочастотного магнитного поля слабонеравновесной спиновой системой в высокотемпературном приближении (ВТП) , когда $T \gg \omega_0, \omega_L$ (ω_0-центральная частота магнитного резонанса, ω_L -частота локального поля, обусловленного диполь-дипольными взаимодействиями). Термодинамические свойства таких систем и магнитная релаксация в ВТП изучены весьма детально [I,2] .

Для последнего времени, однако, характерен интерес к изучению спиновых систем в области низких температур, вплоть до магнитного упорядочения [8-I0] . При этом используется динамическое охлаждение резервуара спин-спиновых взаимодействий, причем

в соответствии с теорией Провоторова спиновая система находится в состоянии двухтемпературного квазиравновесия. Указанная теория, однако, высокотемпературна по отношению как к зеемановской подсистеме, так и к подсистеме взаимодействий, и построение низкотемпературной теории насыщения упирается в соответствующие теории формы линии, магнитной релаксации и термодинамических свойств.

Распространение статистической теории формы линии на низкотемпературный случай было проведено для некоторой частной ситуации в работе [II], в работе [I2] изучалось влияние спин-поляризационных эффектов на фазовую релаксацию. Подсистема взаимодействий в этих работах подразумевалась высокотемпературной. Шаги в сторону построения низкотемпературной теории насыщения были сделаны в работах [I3–I5], однако ни в одной из них не проводился анализ формы линии и термодинамических величин ни для регулярных, ни для разбавленных систем. Изложенный же в [8] анализ нелинейных эффектов в низкотемпературной термодинамике налагает столь сильное ограничение на температуру, что для неупорядоченных систем он практически бесполезен.

В данной работе развит метод корреляционного разложения, который позволил построить статистическую теорию формы линии в магниторазбавленной системе при произвольном охлаждении зеемановской подсистемы (т.е. высокой спиновой поляризации) и на той стадии охлаждения дипольной подсистемы, для которой $\beta\bar{E} \ll 1$, где $\bar{E}$ - энергия взаимодействия спинов на среднем расстоянии, а β -обратная дипольная температура. С помощью концентрационного разложения в том же приближении вычислены теплоёмкости указанных подсистем, входящие в уравнения теории насыщения.

В конкретных расчетах мы ограничивается случаем, когда спин S =1/2, образец имеет эллипсоидальную форму, а распределение спинов по узлам решетки некоррелировано.

2. СИГНАЛ ПОГЛОЩЕНИЯ ПРИ ДВУХТЕМПЕРАТУРНОМ КВАЗИРАВНОВЕСИИ. УРАВНЕНИЯ ТЕОРИИ НАСЫЩЕНИЯ

Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_d' + 2\omega_1 S_x \cos\omega t, \quad \mathcal{H}_z = \omega_0 S_z , \qquad (1)$$

где $\mathcal{H}_d'$ -секулярная часть гамильтониана диполь-дипольных взаимодействий, $\omega_1 = \gamma H_1$ (H_1-амплитуда вращающегося вокруг оси z поля частоты ω). В условиях квазиравновесия матрица плотности системы

$$\rho = \exp(-\beta_z \mathcal{H}_z - \beta \mathcal{H}_d') / Sp\exp(-\beta_z \mathcal{H}_z - \beta \mathcal{H}_d') . \qquad (2)$$

Общее выражение для сигнала поглощения в этих условиях на расстоянии Δ от ларморовской частоты ω_0 в приближении линейного ответа представимо в форме [8]

$$\langle S_y(\Delta)\rangle = -\frac{\omega_1}{4}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\Delta t} \langle [S_+(t), S_-]\rangle , \qquad (3)$$

где временная эволюция определяется оператором $\mathcal{H}_d'$:

$$S_+(t) = e^{i\mathcal{H}_d' t} S_+ e^{-i\mathcal{H}_d' t}.$$

Для дальнейшего существенен переход от коммутаторного среднего $C(t) = \langle [S_+(t), S_-]\rangle$ к антикоммутаторному $A(t) = \langle [S_+(t), S_-]_+\rangle$. Представим (2) в виде $\rho = \exp(-\beta\tilde{\mathcal{H}})/Sp\exp(-\beta\tilde{\mathcal{H}})$,где

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_d' + \beta_z \mathcal{H}_z / \beta .$$

Перейдем в $S_+(t)$ к гамильтониану $\tilde{\mathcal{H}}$:

$$S_+(t) = \exp(-i \frac{\beta_z}{\beta}\omega_0 t) \exp(i\tilde{\mathcal{H}} t) S_+ \exp(-i\tilde{\mathcal{H}} t).$$

После этого имеем:

$$\langle S_y(\Delta)\rangle = -\frac{\omega_1}{4}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, \widetilde{C}(t)\, e^{i(\Delta - \frac{\beta_z}{\beta}\omega_0)t}, \qquad (4)$$

где $\widetilde{C}(t)$ формально соответствует равновесию с температурой β и гамильтонианом $\widetilde{\mathcal{H}}$. Используя известную связь спектральных представлений равновесных корреляционных функций $\widetilde{C}(t)$ и $\widetilde{A}(t)$ [16] и переходя после этого от $\widetilde{\mathcal{H}}$ к исходному гамильтониану, получим

$$\langle S_y(\Delta)\rangle = \frac{\pi}{2}\omega_1 A(0)\, th\,\frac{\beta_z\omega_0 - \beta\Delta}{2}\; g(\Delta), \qquad (5)$$
$$g(\Delta) = \frac{1}{2\pi A(0)}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, A(t)\exp(i\Delta t).$$

Эти соотношения обобщают флуктуационно-диссипационную теорему на двухтемпературный случай. Переход от (3) к (5) важен тем, что функция $g(\Delta)$ неотрицательна при всех Δ. Это доказывается записью $g(\Delta)$ в собственном представлении гамильтониана $\mathcal{H}_z + \mathcal{H}_d'$. Таким образом, сигнал поглощения при произвольных температурах подсистем обращается в ноль в единственной точке $\Delta = \frac{\beta_z}{\beta}\omega_0$ (в ВТП это свойство хорошо известно). Приближённая процедура вычисления $\langle S_y(\Delta)\rangle$ не должна нарушать этого важнейшего свойства. Из него, в частности, следует возможность измерения β при любом соотношении β и β_z путём регистрации нуля сигнала поглощения.

Выражение (5) может стать основой для получения уравнений теории насыщения магнитного резонанса в твердых телах, обобщающих уравнения Провоторова, справедливые в ВТП, на случай произвольных значений β и β_z. Используя точное соотношение $\frac{d}{dt}\langle S_z\rangle = \omega_1\langle S_y\rangle$ [8], вычисляя $\langle S_z\rangle$ с помощью (2) и считая, что временная эволюция системы описывается величинами $\beta_z(t)$ и $\beta(t)$, получим с помощью (5)

$$C_{zz}\frac{d\beta_z}{dt}+C_{zd}\frac{d\beta}{dt}=-\frac{\pi}{2}\omega_1^2\omega_0\, th\frac{\beta_z\omega_0-\beta\Delta}{2}\, g(\Delta)\frac{A(0)}{N}, \quad (6)$$

где $C_{ab}=-\frac{1}{N}\frac{\partial\langle\mathcal{H}_a\rangle}{\partial\beta_b}$ – парциальные теплоёмкости подсистем ($\beta_d\equiv\beta$).

В качестве второго уравнения, как и в ВТП [8], можно применить закон сохранения энергии спиновой системы во вращающейся системе координат. При этом гамильтониан $\mathcal{H}_{BCK}=\Delta S_z+\mathcal{H}_d'$, а матрица плотности, выраженная через зеемановскую температуру в лабораторной системе, по-прежнему имеет вид (2) (дипольная температура в обеих системах одинакова). Условие $\frac{d}{dt}\langle\mathcal{H}_{BCK}\rangle=0$ позволяет получить

$$\left(C_{dd}+\frac{\Delta}{\omega_0}C_{zd}\right)\frac{d\beta}{dt}+\left(C_{dz}+\frac{\Delta}{\omega_0}C_{zz}\right)\frac{d\beta_z}{dt}=0\ . \quad (7)$$

Из (6) и (7) находим

$$\frac{d\beta_z}{dt}=-\frac{A(0)}{2N}\,\frac{\omega_0 C_{dd}+\Delta C_{zd}}{C_{zz}C_{dd}-C_{zd}C_{dz}}\, th\frac{\beta_z\omega_0-\beta\Delta}{2}\,\pi\omega_1^2 g(\Delta),$$

$$\frac{d\beta}{dt}=\frac{A(0)}{2N}\,\frac{\Delta C_{zz}+\omega_0 C_{dz}}{C_{zz}C_{dd}-C_{zd}C_{dz}}\, th\frac{\beta_z\omega_0-\beta\Delta}{2}\,\pi\omega_1^2 g(\Delta)\,. \quad (8)$$

Мы ограничились здесь сравнительно элементарным выводом этих уравнений. Отметим однако, что при более последовательном анализе на основе проекционной техники Накаджима-Цванцига с использованием проектора Кавасаки-Гантона [17] получается тот же результат.

Уравнения (8) в ВТП переходят в уравнения Провоторова. Они отличаются от уравнений, сформулированных в [15], отсутствием неоправданного, на наш взгляд, переопределения подсистем.

В отличие от ВТП C_{ab} и $g(\Delta)$ являются функциями β_z и β, которые в общем случае найти в явном виде невозможно. Ниже с помощью корреляционного разложения найдено $g(\Delta)$, а с помощью концентрационного разложения – C_{ab}.

3. КОРРЕЛЯЦИОННОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ СИГНАЛА ПОГЛОЩЕНИЯ

Важным допущением статистической теории формы линии является возможность ограничиться лишь анизотропной частью гамильтониана $\mathcal{H}_d'$ (модель Андерсона):

$$\mathcal{H}_a = \frac{1}{2}\sum_{jk} n_j n_k \hat{A}_{jk}, \quad \hat{A}_{jk} = A_{jk} S_j^z S_k^z, \quad A_{jk} = \frac{3}{2}\frac{\gamma^2\hbar}{r_{jk}^3}(1-3\cos^2\vartheta_{jk}), \quad A_{kk}=0. \qquad (9)$$

Здесь n_j –число заполнения узла j: $n_j = 1$, если узел j занят спином, и $n_j = 0$, если не занят.

Объектом ближайшего рассмотрения является корреляционная функция $A(t) = \langle\langle [S_+(t), S_-]_+ \rangle\rangle_c$. Здесь $\langle \cdots \rangle_c$ означает конфигурационное усреднение по всем возможным реализациям распределения спинов по узлам решетки. Используя операторное тождество

$$e^{i\hat{A}_{jk}t} S_j^+ e^{-i\hat{A}_{jk}t} = e^{iA_{jk}S_k^z t} S_j^+, \qquad (10)$$

в справедливости которого можно убедиться, например, сравнивая матричные элементы в S_z – представлении спиновой пары, приведём $A(t)$ к виду $A(t) = \sum_k \langle n_k \langle \prod_j \exp(iA_{jk} n_j S_j^z t) \rangle\rangle_c$.

Непосредственное вычисление А (t) не представляется возможным. В данной работе развит метод, намеченный ранее в [3] и состоящий в последовательном учете многочастичных корреляций, аналогичный в известной мере групповым разложениям теории газов. В рассматриваемой задаче можно выделить два типа корреляций: динамические и статистические. Специфика модели Андерсона – возможность точного учета динамических корреляций.

Перепишем $A(t)$ переходя от среднего по матрице плотности (2) к средним по "зеемановской" матрице плотности

$$\rho_0 = exp(-\beta_z \mathcal{H}_z)/Sp\, exp(-\beta_z \mathcal{H}_z),$$

$$A(t)=\sum_K \langle n_K \langle exp[\sum_j n_j (iA_{jK} S_j^z - \beta \hat{A}_{jK} - \frac{\beta}{2}\sum_{m\neq K} n_m \hat{A}_{jm})]\rangle_0 / \quad \text{(II)}$$

$$/\langle exp[-\beta \sum_j n_j (\hat{A}_{jK} + \frac{1}{2}\sum_{m\neq K} n_m \hat{A}_{jm})]\rangle_0 \rangle_c .$$

В (II) явно выделены те члены взаимодействия $\hat{A}_{jK}$, которые обуславливают парные корреляции спина " K ". Слагаемые же, входящие в $\sum_m$, обуславливают корреляции более высокого порядка, и поэтому разложим А (t) по числам заполнения n_m . Разложение функции чисел заполнения по этим числам имеет вид

$$\phi(\{n\}) = \phi^{(0)} + \sum_K n_K (\phi^{(1)}(K) - \phi^{(0)}) +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{K_1 K_2 \neq} n_{K_1} n_{K_2} (\phi^{(2)}(K_1,K_2) - \phi^{(1)}(K_1) - \phi^{(1)}(K_2) + \phi^{(0)}) + \dots = \quad \text{(I2)}$$

$$= \phi^{(0)} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \sum_{K_1 \dots K_m} n_{K_1} n_{K_2} \dots n_{K_m} \sum_{p=0}^{m} (-1)^{m-p} C_m^p \phi^{(p)}(K_1, K_2, \dots, K_p).$$

Здесь $\Phi^{(0)}$ соответствует всем незанятым узлам, $\Phi^{(1)}$ – одному занятому и т.д. Эти формулы можно получить, например, используя тождество $\varphi(n_j) = \varphi(0) + n_j(\varphi(1) - \varphi(0))$ и метод математической индукции. В сумме по $K_1 \dots K_m$ следует исключить любые совпадения значений переменных суммирования и учесть, что все суммирования ограничены одним общим объемом. Перед переходом к бесконечному объему выражение под знаком указанной суммы надо симметризовать.

После конфигурационного усреднения разложение по числам заполнения приводит к разложению искомых макровеличин по степеням концентрации занятых узлов $f = N/N_{уз}$ (N – число спинов),

и при $\varepsilon \ll 1$ достаточно ограничиться первыми членами разложения. Применительно к (II) разложение по n_m является корреляционным разложением и в первом порядке даёт

$$A(t)=A^{(0)}(t)+A^{(1)}(t),\ A^{(0)}(t)=\sum_{\kappa}\langle n_\kappa A_\kappa^{(0)}(t)\rangle_c\ ,$$

$$A^{(1)}(t)=\sum_{\kappa m\neq}\langle n_\kappa n_m\Big[\frac{\langle exp[\sum_j n_j(iA_{j\kappa}S_j^z t-\beta\hat{A}_{j\kappa}-\frac{\beta}{2}\hat{A}_{jm})]\rangle_0}{\langle exp[-\beta\sum_j n_j(\hat{A}_{j\kappa}+\frac{1}{2}\hat{A}_{jm})]\rangle_0}-A_\kappa^{(0)}(t)\Big]\rangle_c, \tag{I3}$$

где

$$A_\kappa^{(0)}(t)=\langle exp[\sum_j n_j(iA_{j\kappa}S_j^z t-\beta\hat{A}_{j\kappa})]\rangle_0/\langle exp(-\beta\sum_j n_j\hat{A}_{j\kappa})\rangle_0\ . \tag{I4}$$

На каждом шаге корреляционного разложения термодинамические средние берутся по сравнительно небольшому числу спинов и могут быть в принципе найдены точно, хотя объем вычислений быстро растет с ростом порядка разложения. Отдельную проблему, которую также удается решить, составляет конфигурационное усреднение.

Вычисления квантовостатистических средних при S =I/2 можно выполнить на основе хорошо известных свойств σ - матриц. В частности, имеет место тождество

$$\varphi(S_\kappa^z)=\frac{1}{2}[\varphi(\tfrac{1}{2})+\varphi(-\tfrac{1}{2})]+S_\kappa^z[\varphi(\tfrac{1}{2})-\varphi(-\tfrac{1}{2})]\ . \tag{I5}$$

Преобразуем с его помощью числитель в (I4):

$$\chi_0^{(0)}(t)=\langle exp[\sum_j n_j(iA_{j\kappa}S_j^z t-\beta A_{j\kappa}S_j^z S_\kappa^z)]\rangle_0=$$

$$=\langle\prod_j\langle exp(in_jA_{j\kappa}S_j^z t-\beta A_{j\kappa}S_j^z S_\kappa^z)\rangle_0^j\rangle_0^\kappa=$$

$$=\langle\prod_j[ch(n_j\tfrac{A_{j\kappa}}{2}(it-\beta S_\kappa^z))+p\,sh(n_j\tfrac{A_{j\kappa}}{2}(it-\beta S_\kappa^z))]\rangle_0^\kappa= \tag{I6}$$

$$=\frac{1+p}{2}\prod_j[ch(n_j\tfrac{A_{j\kappa}}{2}(it-\tfrac{\beta}{2}))+p\,sh(n_j\tfrac{A_{j\kappa}}{2}(it-\tfrac{\beta}{2}))]+$$

$$+(p\to-p,\ i\to-i)\ .$$

Здесь $\langle\cdots\rangle_o^j$ -"зеемановское" среднее по состоянию спина j, $p=2\langle S_k^z\rangle_o=-th\frac{\beta_z\omega_o}{2}$ - спиновая поляризация при бесконечной дипольной температуре. Обозначая знаменатель в (I4) через $Z_o^{(o)}$, имеем $Z_o^{(o)}=X_o^{(o)}(t=0)$. Таким образом, $A^{(o)}(t)=\sum_k\langle n_k X_o^{(o)}/Z_o^{(o)}\rangle_c$. Используя далее легко проверяемое замещением n_j на 1 или 0 тождества

$$th(\alpha n_j)=n_j th\alpha,\ ch(\alpha n_j)=1+n_j(ch\alpha-1), \tag{I7}$$

выделим в $X_o^{(o)}$ и $Z_o^{(o)}$ общий множитель $\prod_j[1+n_j(ch\frac{\beta A_{jk}}{4}-1)]$, сократим его и получим

$$A^{(o)}(t)=\sum_k\langle n_k X_1^{(o)}(t)/Z_1^{(o)}\rangle_c,$$

$$X_1^{(o)}(t)=\frac{1+p}{2}\prod_j[1-n_j(1-\cos_{jk}(1-p\,th_{jk})-i\sin_{jk}(p-th_{jk}))]+$$

$$+(p\to-p,\ i\to-i),\quad Z_1^{(o)}=X_1^{(o)}(t=0). \tag{I8}$$

Здесь $\cos_{jk}=\cos\frac{A_{jk}t}{2}$, $\sin_{jk}=\sin\frac{A_{jk}t}{2}$, $th_{jk}=th\frac{\beta A_{jk}}{4}$.
Используя тождество

$$\prod_j[1+n_j(a_j+b_j)]=\prod_j(1+n_j a_j)\prod_j\left(1+\frac{n_j b_j}{1+a_j}\right), \tag{I9}$$

выделим в $A^{(o)}(t)$ множитель

$$G_k(t)=\prod_{j\neq k}G_{jk}(t)=\prod_{j\neq k}[1+n_j(\cos_{jk}-1+ip\sin_{jk})], \tag{20}$$

обеспечивающий точный учет динамических корреляций, подвергнем оставшееся выражение дополнительному разложению по числам заполнения и получим основной и первый поправочный члены:

$$A^{(o)}(t)\simeq A^{(0,0)}(t)+A^{(0,1)}(t)=\sum_k\langle n_k G_k(t)\rangle_c-$$
$$-ip(1-p^2)\sum_{k\neq m}\langle n_k n_m\prod_{j\neq k,m}G_{jk}(t)\frac{th_{mk}\sin_{mk}}{1-p^2 th_{mk}}\rangle_c. \tag{2I}$$

Выражение (2I) допускает конфигурационное усреднение. При некоррелированном распределении спинов по узлам $\langle n_j \rangle_c = f$, $\langle n_i n_j \rangle_c = f^2 \, (i \neq j)$ и т.д. После усреднения имеем

$$A^{(0,0)}(t) = f \sum_{k} \prod_{j \neq k} \left[1 + f(\cos_{jk} - 1 + ip \sin_{jk}) \right], \tag{22}$$

$$A^{(0,1)}(t) = -ip(1-p^2) f^2 \sum_{km \neq} \prod_{j \neq km} \left[1 + f(\cos_{jk} - 1 + ip \sin_{jk}) \right] \cdot \frac{th_{km} \sin_{km}}{1 - p^2 th_{km}} . \tag{23}$$

Выражения (22), (23) в определенном смысле являются окончательными. В них вычислены как термодинамические, так и конфигурационные средние. Далее, для получения точных количественных результатов, следует конкретизировать форму образца, тип кристаллической решетки, ориентацию внешнего поля относительно образца и производить численные расчеты по формулам (22), (23). Этот путь, однако, малопригоден как в практическом, так и в теоретическом плане. Оценки показывают, что нельзя рассчитывать на непосредственное вычисление полученных решеточных сумм для сколько-нибудь "большого" образца за приемлемое время. В теоретическом отношении из сравнения (22) и (23) нельзя непосредственно установить истинный параметр, по которому произведено дополнительное разложение; маловероятно, что таким параметром является f . Как показывают многие прецеденты, ответ на эти качественные вопросы и выполнение асимптотических оценок выражений типа (22), (23) можно получить в приближении сплошной среды (ПСС), к которому мы перейдем после того, как оценим порядок $A^{(1)}(t)$ по f.

Вычисление термодинамических средних, входящих в $A^{(1)}(t)$, производится с помощью тождества

$$\langle \varphi(S_k^z, S_m^z) \rangle_0 = \frac{(1+p)^2}{4} \varphi\left(\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right) + \frac{(1-p)^2}{4} \varphi\left(-\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\right) + \frac{1-p^2}{4} \left[\varphi\left(\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\right) + \varphi\left(-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right) \right], \tag{24}$$

получаемого двукратным использованием формулы (I5). Преобразования, аналогичные произведенным выше при вычислении $A^{(0)}(t)$, позволяют привести $A^{(I)}(t)$ к виду

$$A^{(1)}(t)=\sum_{km\neq}\left\langle n_k n_m\left[\frac{X_1^{(1)}(t)}{Z_1^{(1)}}-\frac{X_1^{(0)}(t)}{Z_1^{(0)}}\right]\right\rangle_c , \qquad (25)$$

где

$$X_1^{(1)}(t)=\frac{(1+p)^2}{4}\prod_{j\neq k}\left[1+n_j\left(-1+(\cos_{jk}+ip\sin_{jk})(1+th_{jk}th_{jm})-(p\cos_{jk}+i\sin_{jk})(th_{jk}+th_{jm})\right)\right]+$$

$$+\frac{(1-p)^2}{4}\prod_{j\neq k}\left[1+n_j\left(-1+(\cos_{jk}+ip\sin_{jk})(1-th_{jk}th_{jm})+(p\cos_{jk}+i\sin_{jk})(th_{jm}-th_{jk})\right)\right]+ \qquad (26)$$

$$+(p\to -p,\ i\to -i),\quad Z_1^{(1)}=X_1^{(1)}(t=0).$$

Здесь обозначения $\cos_{jk}$, $\sin_{jk}$, th_{jk} имеют тот же смысл, что и в (I8), а $th_{jm}=th\frac{\beta A_{jm}}{8}$. Выделяя в (25) общий множитель $G_k(t)$ и дополнительно разлагая оставшееся выражение по числам заполнения, получаем, что $A^{(I)}(t)\sim\delta^3$. Таким образом, (23) полностью содержит члены порядка δ^2 в разложении (I3).

4. ПРИБЛИЖЕНИЕ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ (ПСС).

Из формул (22) и (23) видно, что ПСС для функции формы линии справедливо при выполнении условий $\delta\ll 1$ и $E_0 t\gg 1$, где $E_0=\gamma^2\hbar/r_{min}^3$, а r_{min} -наименьшее расстояние между спинами в решетке. Первое из этих условий позволяет пренебречь запретом на совпадения координат разных спинов, а благодаря второму условию в той области, где функции сильно меняются при переходе из узла в узел (и поэтому, вообще говоря, замена сумм на интегралы незаконна) они одновременно сильно осциллируют и вклад этих осцилляций зануляется. Ограничимся рассмотрением эллипсоидальных образцов в высокосимметричных (например, кубических)

решетках. Для них фигурирующие ниже решеточные суммы вида $\sum_m \varphi(\vec{r}_{km})$ практически не зависят от положения узла k.

Переход к ПСС в (22) осуществляется следующим образом:

$$\prod_j (1+f\alpha_{jk}) = \exp\sum_j \ln(1+f\alpha_{jk}) \approx \exp(f\sum_j \alpha_{jk}) \approx \exp\left(c\int d^3r\, \alpha(\vec{r})\right), \quad (27)$$

где $C = fn$ -объемная концентрация спинов (n - число узлов в единице объема). Центр интегрирования соответствует узлу "k". Полный переход в (22), (23) к ПСС дает

$$A^{(0,0)}(t) = Ne^{-c\mathcal{J}_1(t)}, \quad A^{(0,1)}(t) = -ip(1-p^2)cN\mathcal{J}_2(t)e^{-c\mathcal{J}_1(t)}, \quad (28)$$

где

$$\mathcal{J}_1(t) = \int d^3r \left[1 - \cos\frac{A(\vec{r})t}{2} - ip\sin\frac{A(\vec{r})t}{2}\right], \quad (29)$$

$$\mathcal{J}_2(t) = \int d^3r \; \frac{th\,\frac{\beta A(\vec{r})}{4}}{1-p^2\, th\,\frac{\beta A(\vec{r})}{4}} \; \sin\frac{A(\vec{r})t}{2}. \quad (30)$$

Вычисление интегралов вынесено в Приложение I. Используя (П4), (П5), имеем

$$A^{(0,0)}(t) = Ne^{-D|t| + i\delta t}, \quad A^{(0,1)}(t) = -\frac{i}{2}p(1-p^2)\beta D A^{(0,0)}(t)\frac{t}{|t|}$$

(в длинновременном пределе). Здесь $D = 2\pi^2 c\gamma^2\hbar/(3\sqrt{3})$, $\delta = \left[\frac{2\pi}{3\sqrt{3}}\left(\sqrt{3} - \ln\frac{\sqrt{3}+1}{\sqrt{3}-1}\right) - \pi\xi\right]pc\gamma^2\hbar$ $(-1 \leq \xi \leq 2$ в зависимости от ориентации эллипсоида относительно внешнего поля и соотношения длин осей). Видно, что параметром, по которому ведется корреляционное разложение во временном представлении, является величина $\zeta = \beta D \sim \beta c\gamma^2\hbar \sim \beta\overline{E}$, т.е. произведение обратной температуры подсистемы взаимодействий на энергию взаимодействия спинов на среднем расстоянии.

Как показано в Приложении I, в Фурье-преобразование величины $A^{(0,1)}(t)$ вносят большой вклад относительно малые времена. Поэтому для получения сигнала поглощения уместно выполнить Фурье-преобразование непосредственно от $A^{(0,I)}(t)$, определенной формулами (28) - (30). Используя (П8), в целом для функции формы получаем

$$g(\Delta)=\frac{1}{\pi}\frac{D}{(\Delta+\delta)^2+D^2}\left(1+\varkappa(\Delta)\right),$$
$$\varkappa(\Delta)=\rho(1-\rho^2)\frac{th\left(\beta(\Delta+\delta)/2\right)}{1-\rho^4 th^2\left(\beta(\Delta+\delta)/2\right)}. \tag{3I}$$

Отметим, что $|\varkappa|<1/2$. Простейшее условие применимости (3I) можно сформулировать как

$$|\varkappa|\ll 1\,,\ |\beta D|=\xi\ll 1\,. \tag{3Ia}$$

Однако, формула (3I) остается физически осмысленной при всех β_z и Δ. Поэтому возможно, что первое из неравенств (3Ia) слишком сильное и в действительности оно излишне. Для более определенного вывода необходим анализ следующего члена корреляционного разложения.

5. КОНЦЕНТРАЦИОННОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

Энергии и теплоемкости можно выразить через функцию

$$F(\beta,\beta_z)=-\langle \ln Sp\, e^{-\beta_z \mathcal{H}_z-\beta\mathcal{H}_d'}\rangle_c=F_z-\langle \ln\langle e^{-\beta\mathcal{H}_d'}\rangle_0\rangle_c\,,$$

где $F_z=F(0,\beta_z)$. Очевидно, что

$$\langle \mathcal{H}_a\rangle=\frac{\partial F}{\partial\beta_a}\,,\quad c_{ab}=-\frac{1}{N}\frac{\partial^2 F}{\partial\beta_a\partial\beta_b}=c_{ba}\,.$$

Разлагая F по числам заполнения из $\mathcal{H}_d'$ и производя усреднение, в главном порядке по ℓ имеем

$$F = F_z - \frac{\ell^2}{2} \sum_{jk} \ln \langle \exp(-\beta \mathcal{H}_d'(j,k)) \rangle_0 = F_z + F_c . \qquad (32)$$

Здесь $\mathcal{H}_d'(j,k)$ есть гамильтониан дипольного взаимодействия двух спинов, расположенных в j и k. Запишем $\mathcal{H}_d'(j,k)$ в виде

$$\mathcal{H}_d'(j,k) = A_{jk} (S_j^z S_k^z - \alpha \vec{S}_j \vec{S}_k). \qquad (33)$$

Стандартному диполь-дипольному гамильтониану отвечает $\alpha = \frac{1}{3}$, а модели Андерсона $\alpha = 0$. Учитыва.., что $[S_j^z S_k^z , \vec{S}_j \vec{S}_k] = 0$, применяя легко проверяемую формулу

$$\varphi(\vec{S}_j \vec{S}_k) = \frac{3}{4}\varphi(\tfrac{1}{4}) + \frac{1}{4}\varphi(-\tfrac{3}{4}) + \vec{S}_j \vec{S}_k [\varphi(\tfrac{1}{4}) - \varphi(-\tfrac{3}{4})], \quad S = \frac{1}{2} ,$$

и соотношение (24), можно получить, что

$$\langle e^{-\beta \mathcal{H}_d'(j,k)} \rangle_0 = \frac{1}{4} e^{-\frac{1-\alpha}{4}\beta A_{jk}} \left[2(1+p^2) + (1-p^2) e^{\frac{\beta A_{jk}}{2}} (1 + e^{-\alpha \beta A_{jk}}) \right]. \qquad (34)$$

Вообще говоря, расчет теплоемкостей (кроме $C_{zz} = \left(\frac{\omega_0}{2}\right)^2 (1-p^2)$) весьма громоздок и необходим численный анализ. Отметим лишь, что C_{dd} и C_{zz} не зависят, а C_{dz} зависит от формы образца. Существенные упрощения происходят в высокотемпературном приближении, когда $\beta E_0 \ll 1$ и в противоположном, "низкотемпературном" случае, когда $\beta E_0 \gg 1$. Напомним, что при этом по-прежнему $\beta \mathcal{D} \sim \ell \beta E_0 \ll 1$.

Результаты ВТП легко получаются разложением полученных выражений по β. В "низкотемпературном" случае как F, так и энергии $\partial F / \partial \beta_a$ не допускают перехода к пределу сплошной среды, т.е. замены сумм на интегралы по всему пространству, вследствие сингулярности A_{jk} на малых расстояниях.

Однако, для теплоемкостей такой переход возможен и приводит к

$$C_{dd} = \frac{D}{2\pi|\beta|}, \quad C_{dz} = D\omega_0 \varphi(P). \tag{35}$$

При этом для φ, зависящей только от Р, получается представление однократным интегралом (подробности см.в Приложении 2). Эти результаты означают, что в температурной области, где $E_0 \gg \frac{1}{\beta} \gg D$, теплоемкости, в основном, определяются взаимодействиями на средних (а не малых, как в ВТП) расстояниях, и, соответственно, термодинамика оказывается совершенно иной, чем в ВТП.

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Рассмотрим выражение для формы линии (3I). Как уже отмечалось, $|\varkappa| < 1/2$ и, следовательно, $g(\Delta) > 0$, что необходимо согласно п.2. В случае высокотемпературной подсистемы взаимодействий, когда для любых представляющих интерес частот $|\beta\Delta| \ll 1$, т.е. при $\beta E_0 \ll 1$, (3I) переходит в

$$g(\Delta) = \frac{1}{\pi} \frac{D}{(\delta+\Delta)^2 + D^2}. \tag{36}$$

В этом случае можно сопоставить наши результаты с результатами работ [II,I2]. Как и там, мы приходим к лоренциану, ширина которого D не зависит от поляризации. Однако, даже для сферического образца формула (36) предсказывает существование сдвига частоты магнитного резонанса, пропорционального концентрации и поляризации спинов. Этот эффект, который на первый взгляд противоречит классической макроскопической электродинамике, целиком определяется флуктуациями в случайном распределении спинов; обсуждение этого вопроса проведено в работе [I8].

В случае, когда система полностью размагничена, а дипольная подсистема охлаждена,

$$< S_y(\Delta) > = -N \frac{\omega_1}{2} th \frac{\beta\Delta}{2} \frac{D}{(\Delta+\delta)^2 + D^2} , \qquad (36)$$

т.е. сигнал поглощения почти антисимметричен относительно ларморовской частоты (с точностью до сдвига) и обращается в ней в ноль. Подобное поведение сигнала поглощения хорошо известно в случае высокотемпературной подсистемы взаимодействий [8] .

Полученные формулы допускают (как и в ВТП) использование отрицательных дипольных температур. Это свойство верно в любом конечном порядке концентрационного разложения и обусловлено ограниченностью спектра $\mathcal{H}'_d$ для любого конечного числа спинов. Однако, в отличие от ВТП, вообще говоря, $C_{ab}(\beta_z,\beta) \neq C_{ab}(-\beta_z,-\beta)$.

То обстоятельство, что параметром малости, соответствующим корреляционному разложению, оказались величины $\varkappa$ и ξ, делает выражение (3I) применимым к изучению широкого круга явлений, связанных с динамическим охлаждением подсистемы взаимодействий. В частности, оказывается доступной температурная область, в которой начинается переход системы дипольно-взаимодействующих спинов в фазу дипольного стекла [I9] .

В следующем порядке корреляционного разложения весьма громоздкие расчеты, связанные, в частности, с вычислением двухцентровых интегралов, показывает, что длинновременная асимптотика $A^{(4)}(t) \sim N D^2 |\beta t| exp(-D|t| + i\delta t)$, и поэтому в низкочастотной асимптотике ширина линии D и сдвиг δ получают приращения, пропорциональные ξ. Простая картина высокочастотной асимптотики нам неизвестна.

Интересно отметить, что корреляционное разложение в любом порядке свободно от объемных расходимостей, появление которых

столь усложняет работу с высокотемпературными разложениями теории магнетизма [8] . Это можно показать в общем виде используя (12).

Как отмечалось выше, модель Андерсона позволила произвести точный учет динамических корреляций для функции формы линии. Аналогичная теория в ВТП дает вполне удовлетворительные результаты. Однако выход за пределы ВТП в связи с охлаждением резервуара взаимодействий ставит вопрос о роли изотропной части гамильтониана, включающей флип-флопы, при низких температурах. Развитый в данной работе метод не распространяется непосредственно на этот случай. Формально это связано с невозможностью факторизовать $S_+(t)$. Простое концентрационное разложение $A(t)$, возможное для произвольного взаимодействия, напрямую непригодно, т.к. в каждом его порядке возникает незатухающая функция времени. Разработан, однако, другой подход к теории функции формы линии в разбавленных системах [20] , базирующийся на том же разложении по числам заполнения (12) с привлечением метода функций памяти. Этот подход позволил решить задачу о форме линии в ВТП с учетом изотропной части взаимодействия. Распространение этого метода на случай низких температур позволяет сделать предварительное заключение, что при $|\beta D| \ll 1$ отличия от результатов, полученных в модели Андерсона, невелики. Этот вопрос впоследствии будет обсужден подробно.

Найденные в данной работе выражения для формы линии и теплоемкостей достаточны для решения уравнений (8) , описывающих кинетику насыщения спин-системы в твердых телах, в указанном выше температурном диапазоне. Однако, не менее важные аспекты теории насыщения связаны с учетом спин-решеточной релаксации.

В отличие от ВТП простой феноменологический ее учет был бы неубедителен, т.к. "времена релаксации" вне ВТП зависят от температур подсистем. Этот вопрос требует самостоятельного изучения.

Другой очень важный вопрос состоит в том, что в широком диапазоне амплитуд H_1 переменного поля неупорядоченные системы ведут себя как неоднородноуширенные. Это выявлено в работе /21/ и должно приниматься во внимание при сопоставлении изложенной выше теории с экспериментом.

Приложение I

Рассмотрим вначале $\mathcal{J}_1(t)$. Представим его в виде $\mathcal{J}_1(t) = W(t) - ip\,T(t)$, где

$$W(t) = \int d^3r \left(1 - \cos\frac{A(\vec{r})t}{2}\right), \quad T(t) = \int d^3r \sin\frac{A(\vec{r})t}{2}. \tag{П1}$$

Имеем: $A(\vec{r}) = 3\gamma^2\hbar(1-3\cos^2\vartheta)/(2r^3)$. Обозначим $b(\vartheta) = \frac{3}{4}\gamma^2\hbar t(1-3\cos^2\vartheta)$, сделаем замену переменных $X = 1/r^3$, $Y = \cos\vartheta$ и получим

$$W = \frac{4\pi}{3}\int_0^1 dy \int_{X_{min}}^{X_{max}} dx\, \frac{1-\cos b(y)x}{x^2}, \quad T = \frac{4\pi}{3}\int_0^1 dy \int_{X_{min}}^{X_{max}} dx\, \frac{\sin b(y)x}{x^2}. \tag{П2}$$

Здесь $X_{min} = 1/r^3_{max}$, $X_{max} = 1/r^3_{min}$. Для тех интегралов, которые регуляризованы на малых расстояниях, $X_{max} \to \infty$, для бесконечного сферического образца $X_{min} \to 0$. После интегрирования по частям и использования асимптотических представлений интегрального синуса и косинуса получим, что для сферического образца при $|A_{max}t| \gg 1$

$$W = \frac{2\pi^2\gamma^2\hbar|t|}{3\sqrt{3}}, \quad T = \pi\gamma^2\hbar t\int_0^1 dy\,(3y^2-1)\ln|3y^2-1|. \tag{П3}$$

Входящий в (П3) интеграл равен не 0 [11], а $\frac{2}{3\sqrt{3}}\left(\sqrt{3} - \ln\frac{\sqrt{3}+1}{\sqrt{3}-1}\right)$.

Таким образом, в этом приближении $J_1(t)=r^2\hbar(3{,}80|t|-0{,}50\,ipt)$.
В случае конечного образца эллипсоидальной формы сумма, порождающая интеграл W,

$$\sum_j\left(1-\cos\frac{A_{jk}t}{2}\right)=\sum_j\left[\frac{1}{2!}\left(\frac{A_{jk}t}{2}\right)^2-\frac{1}{4!}\left(\frac{A_{jk}t}{2}\right)^4+\dots\right]$$

составлена из быстро сходящихся решеточных сумм $\sum_j A_{jk}^n$, $n\geqslant 2$, и от местонахождения узла k практически не зависит.
Решеточная сумма, порождающая интеграл T,

$$\sum_j \sin\frac{A_{jk}t}{2}=\sum_j\left[\frac{A_{jk}t}{2}-\frac{1}{3!}\left(\frac{A_{jk}t}{2}\right)^3+\dots\right]$$

содержит вклад от первого слагаемого в правой части, зависящий, вообще говоря, от формы образца и местонахождения узла k; для эллипсоида, однако, $\sum_j A_{jk}$ от местонахождения "k" не зависит. В этом случае представим

$$\sum_j \sin\frac{A_{jk}t}{2}=\sum_j\left(\sin\frac{A_{jk}t}{2}-\frac{A_{jk}t}{2}\right)+\sum_j\frac{A_{jk}t}{2},$$

и первая $\sum$ перестает зависеть от формы образца и может быть вычислена по сфере с центром в "k". Учтем, что для кубических решеток [8] $\sum_j A_{jk}=2\pi\xi r^2\hbar$, где $-1\leqslant\xi\leqslant 2$ (в зависимости от соотношения осей эллипсоида и ориентации внешнего поля; для сферы $\xi=0$). Таким образом, для эллипсоида

$$cJ_1(t)=D|t|-i\delta t, \tag{П4}$$

где $D=\frac{2\pi^2}{3\sqrt3}cr^2\hbar$, $\delta=\left[\frac{2\pi}{3\sqrt3}\left(\sqrt3-\ln\frac{\sqrt3+1}{\sqrt3-1}\right)-\pi\xi\right]pcr^2\hbar$.

Оценим $J_2(t)$. Ограничимся вначале простой ситуацией высокотемпературной подсистемы взаимодействий. Тогда

$$J_2(t)=\frac{\beta}{4}\int d^3r\,A(\vec r)\sin\frac{A(\vec r)t}{2}=\frac{\beta}{2}\frac{dW(t)}{dt}=\frac{\beta}{2}\cdot\frac{2\pi^2}{3\sqrt3}r^2\hbar\,\mathrm{sign}\,t. \tag{П5}$$

Отказ от условия высокотемпературности не изменит длинновременной асимптотики $\mathcal{J}_2(t)$, определяемой (П5). Для оценки достаточно ограничиться аппроксимацией $th\, a = a$ при $|a| < 1$ и $th\, a = 1$ при $|a| \geqslant 1$. Переходя к переменным x,y и разбивая область интегрирования в плоскости xy на части, соответствующие "высокотемпературным" и "низкотемпературным" спинам, получим, что вклад в $\mathcal{J}_2$ от "низкотемпературных" спинов пропорционален $\frac{\beta}{2t}\cos\frac{2t}{\beta}$ и $\frac{\beta}{2t}\sin\frac{2t}{\beta}$, т.е. при больших временах, $t \gg \beta$, пренебрежимо мал по сравнению с (П5).

Однако, это не означает, что вклад от "низкотемпературных" спинов мал в Фурье-преобразовании величины $A^{(0,1)}(t)$, которое интересует нас в связи с получением сигнала поглощения. Вычислим это Фурье-преобразование непосредственно:

$$A^{(0,1)}(\Delta)=\int_{-\infty}^{\infty}dt\, A^{(0,1)}(t)e^{i\Delta t}=-ip(1-p^2)cN\int_{-\infty}^{\infty}dt\, e^{i\Delta t-c\mathcal{J}_1(t)}\mathcal{J}_2(t), \quad (\text{П6})$$

где $\mathcal{J}_2(t)$ определяется формулой (30), а $\mathcal{J}_1(t)$ -формулой (П4).

Имеем

$$A^{(0,1)}(\Delta)=p(1-p^2)cN\int d^3r\,\frac{th\frac{\beta A(\vec{r})}{4}}{1-p^2 th\frac{\beta A(\vec{r})}{4}}\cdot$$

$$\cdot\Big[\frac{D}{(\frac{1}{2}A(\vec{r})-\Delta-\delta)^2+D^2}-\frac{D}{(\frac{1}{2}A(\vec{r})+\Delta+\delta)^2+D^2}\Big]. \quad (\text{П7})$$

Переходя к координатам r, ϑ, φ и делая указанные при выводе (П2) замены переменных, получим, выполнив интегрирование по y,

$$A^{(0,1)}(\Delta)=\frac{1}{4\pi}p(1-p^2)\beta^3 D^2 N\int_0^{\infty}d\tau\cdot\frac{th\tau}{\tau^2}\cdot\frac{1}{1-p^4 th^2\tau}\cdot \quad (\text{П8})$$

$$\cdot\Big[\frac{1}{(\tau-\mu)^2+\nu^2}-\frac{1}{(\tau+\mu)^2+\nu^2}\Big],$$

где $\mu = \frac{\beta}{2}(\Delta+\delta)$, $\nu = \frac{\beta}{2}D$. Представим подынтегральную функцию в виде $f(\tau)\varphi(\tau)$, где $f(\tau) = th\,\tau/[\tau(1-p^4 th^2\tau)]$, $\varphi(\tau) = \frac{1}{\tau}\left[\frac{1}{(\tau-\mu)^2+\nu^2} - \frac{1}{(\tau+\mu)^2+\nu^2}\right]$. Функция $\varphi(\tau)$ имеет при $\tau > 0$ резонансный экстремум в точке $\tau = |\mu|$ шириной $\sim \nu$, а функция $f(\tau)$ на промежутке $[|\mu|-|\nu|, |\mu|+|\nu|]$ практически постоянна, учитывая, что $\nu \ll 1$. Положим поэтому $f(\tau) = f(\mu)$ и проинтегрируем $\varphi(\tau)$:

$$A^{(0,1)}(\Delta) = 2p(1-p^2)N\,\frac{th(\beta(\Delta+\delta)/2)}{1-p^4 th^2(\beta(\Delta+\delta)/2)}\cdot\frac{D}{(\Delta+\delta)^2+D^2}. \qquad (\text{П9})$$

Приложение 2

F_c, определенное соотношениями (32)-(34) можно, в случае эллипсоидальных образцов с высокосимметричной решеткой, представить в виде

$$F_c = -\frac{1}{2}fN(K_1+K_2+K_3+K_4), \qquad (\text{П10})$$

$$K_1 = -\frac{p^2}{4}\sum_j (a_j - b_j) = -\frac{p^2}{2}\pi\xi\beta(1-\alpha)r^2\hbar, \qquad (\text{П11})$$

$$K_2 = \sum_j\left[\vartheta(a_j>0)\frac{a_j^2}{2(1+a_j)} - \frac{1-p^2}{4}\cdot\frac{(a_j-b_j)|a_j-b_j|}{1+|a_j-b_j|}\right], \qquad (\text{П12})$$

$$K_3 = \sum_j \vartheta(a_j<0)\left(\ln Q_j - \frac{1-p^2}{4}\,\frac{a_j-b_j}{1+|a_j-b_j|}\right), \qquad (\text{П13})$$

$$K_4 = \sum_j \vartheta(a_j>0)\left[\ln\left(Q_j e^{-\frac{a_j}{2}}\right) - \frac{1-p^2}{4}\cdot\frac{a_j-b_j}{1+|a_j-b_j|} + \frac{a_j}{2(1+a_j)}\right], \qquad (\text{П14})$$

$$Q_j = \frac{1}{4}\left[2(1+p^2) + (1-p^2)e^{\frac{a_j}{2}}(1+e^{-b_j})\right].$$

Здесь $a_j=\beta A_{j0}$, $b_j=\lambda\beta A_{j0}$, а ξ определено при выводе (П4). От формы образца зависит только K_I. Во всех остальных решеточных суммах будем считать, что образец является сферическим. Для перехода к ПСС представим K_2 в форме

$$K_2=\sum_{r_j<R}\vartheta(a_j>0)\cdot\frac{1}{2}a_j-\sum_{r_j<R}\vartheta(a_j>0)\frac{a_j}{2(1+a_j)}+ \qquad (\text{П5})$$

$$+\sum_{r_j>R}\vartheta(a_j>0)\frac{a_j^2}{2(1+a_j)}+\frac{1-\rho^2}{4}\sum_j\frac{a_j-b_j}{1+|a_j-b_j|}-\frac{1-\rho^2}{4}\sum_j(a_j-b_j).$$

Для кубических решеток последний член равен нулю. В "низкотемпературном" пределе, когда $\beta E_0\gg I$, от взаимодействия с ближайшими соседями зависит только первый член из (П5), но он не дает вклад в теплоемкости. В остальных членах, а также в K_3 и K_4 интегрирования по угловым и радиальным переменным разделяются после замены $r\to r/\beta(1-3\cos^2\vartheta)|^{1/3}$, а K_2 легко вычисляется в явной форме, что и приводит к результатам, изложенным в основном тексте.

ЛИТЕРАТУРА

1. Абрагам А. Ядерный магнетизм. М.: ИЛ, 1963, гл.5.
2. Альтшуллер С.А., Козырев Б.М. Электронный парамагнитный резонанс. М.: Наука, 1972, гл.4.
3. Джепаров Ф.С., Смелов В.С., Шестопал В.Е. Письма в ЖЭТФ, 1980, 32, с.51-56.
4. Гринберг Е.С., Кочелаев Б.И., Халиуллин Г.Г. - ФТТ, 1981, 23, с.397-404.
5. Anderson P.W. - Compt.Rend., 1951, 82, p.342-354.
6. Grant W.J.C., Strendberg W.J.P. - Phys.Rev., 1964, 135, A715-A726.
7. Джепаров Ф.С., Лундин А.А., Хазанович Т.Н. Тезисы докладов Всесоюзной конференции по магнитному резонансу. Казань, 1984, ч.3, с.28.
8. Абрагам А., Гольдман М. Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок. М.: Мир, 1984, гл.5,8.
9. Ацаркин В.А., Демидов В.В. Хлебников С.Я. - Письма в ЖЭТФ, 1980, 32, с.461-464.
10. Kotzler K., Eiselt G. - Phys.Rev., 1982, B25, p.3207-3214.
11. Альтшуллер С.А., Мокеев А.А. - ФТТ; 1969, 11, с.35-43.
12. Maryasov A.G., Dzuba S.A., Salikhov K.M. - J.Magn.Reson, 1982, 50, p.432-450.
13. Кочелаев Б.И., Нигматуллин Р.Р. - ФТТ, 1972, 14, с.3414-3419.
14. De Haas L.J., Wenckenbach W.Th., Poulis N.J. - Physica, 1981, 111B, p.219-230.
15. Бунишвили Л.Л., Фокина Н.П. - ФТТ, 1983, 25, с.381-386.

I6. Т я б л и к о в С.В. Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, I975, гл.7,8.

I7. K a w a s a k i K., G u n t o n J.D. – Phys.Lett.,1972, 40A, p.35–36.

I8. Д ж е п а р о в Ф.С., Х е н н е р Е.К. – ФТТ, I986, 28, с.2I80–2I82.

I9. Х е н н е р Е.К. – ФТТ, 26, с.2779–2784.

20. Д ж е п а р о в Ф.С., Л у н д и н А.А., Х а з а н о в и ч Т.Н. – ЖЭТФ, I987, 92, № 2, с.554.

2I. А ц а р к и н В.А., В а с н е в а Г.А., Д е м и д о в В.В. – ЖЭТФ, I986, 9I,I523–I535.

Ф.С.Джепаров, Е.К.Хеннер

Магнитный резонанс в магниторазбавленных твердых телах при низких температурах.

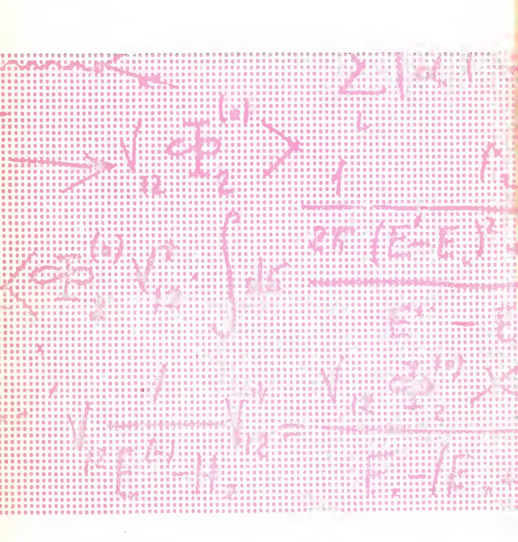
Редактор И.Н.Ломакина Корректор О.Ю.Ольховникова

Работа поступила в ОНТИ 30.I2.86

Подписано к печати I4,0I.87 Т03527 Формат 60x90 I/I6
Офсетн.печ. Усл.-печ.л.I,5. Уч.-изд.л.I,I. Тираж 253 экз.
Заказ I0 Индекс 3624 Цена I6 коп.

Отпечатано в ИТЭФ, II7259, Москва, Б.Черемушкинская,25

16 коп. ИНДЕКС 3624



М., ПРЕПРИНТ ИТЭФ, 1987, № 10, с.1–24